제10장 시간에 무관한 건드림(섭동) 이론
(Time-Independent Perturbation Theory)

우리가 정확히 풀 수 있는 양자역학적인 계는 실제로 많지 않다. 때문에 우리는 정확하게 풀리는 보다 간단한 계로부터 약간 건드려진 추가적인 상호작용을 포함하는 계를 섭동이론을 통하여 근사적으로 풀 수 있다. 이 장에서는 건드림(섭동)이 시간에 무관한(time independent) 경우를 다루고 시간에 의존하는(time dependent) 경우는 나중에 다룰 것이다. 시간에 무관한 섭동의 경우 건드려지기 전 해밀토니안(unperturbed Hamiltonian)의 고유상태들이 겹친(degenerate) 경우와 겹치지 않은(nondegenerate) 경우에 따라 섭동 계산법이 다르게 된다. 우리는 먼저 보다 간단한 건드려지기 전 해밀토니안의 고유상태들이 겹치지 않은 경우를 다루고 다음으로 겹친 경우를 다룰 것이다.

10.1 겹치지 않은 경우 (Nondegenerate Case)

실제 계(real system)보다 간단한 정확히 풀리는(exactly solvable) 계의 해밀토니안을 건드려지기 전 해밀토니안 H_0 라고 하고 실제 계에 근접하게 기술해주는 추가적인 건드림을 건드림 해밀토니안(perturbation Hamiltonian) $\lambda H'$ 으로 표시하면 전체 해밀토니안(total Hamiltonian) H 는 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$H = H_0 + \lambda H' \quad \text{-------} \quad (1.1)$$

여기서 λ는 작은 건드림을 표시하는 1보다 작은 장부정리용(bookkeeping purpose)으로 도입한 매개변수이다. 이 경우 건드려지기 전 해밀토니안의 경우 우리가 그 정확한 해를 알고 있다고 가정한다.

$$H_0\,\psi_n^{(0)} = E_n^{(0)}\,\psi_n^{(0)}, \quad n = 1,2,3,\ldots \quad \text{------} \ (1.2)$$

여기서 첨자(0)은 건드려지기 전 상태임을 나타낸다.

이제 전체 해밀토니안이 시간에 무관한 슈뢰딩거 방정식의 해 ψ_n 을 다음과 같이 가진다고 가정하자.

$$H\,\psi_n = E_n\,\psi_n, \quad n = 1,2,3,\ldots \quad \text{-------} \ (1.3)$$

여기서 E_n 은 고유상태 ψ_n 이 가지는 에너지이다. 이제 슈뢰딩거 방정식 (1.3)을 풀기 위하여 전체 해밀토니안 H 의 에너지 E_n 과 고유상태 ψ_n 이 다음과 같이 전개된다고 가정하자.

$$\psi_n = \psi_n^{(0)} + \lambda\psi_n^{(1)} + \lambda^2\psi_n^{(2)} + \cdots\ , \quad E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \cdots\ .$$

이를 방정식 (1.3)에 대입하면 (1.3)번 식은 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\left(H_0 + \lambda H'\right)\left(\psi_n^{(0)} + \lambda\psi_n^{(1)} + \lambda^2\psi_n^{(2)} + \cdots\right) = \left(E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \cdots\right)\left(\psi_n^{(0)} + \lambda\psi_n^{(1)} + \lambda^2\psi_n^{(2)} + \cdots\right)$$

이제 위 식을 λ의 차수에 따라 다시 쓰면 다음의 방정식들을 얻는다.

λ의 0승 : $H_0\psi_n^{(0)} = E_n^{(0)}\psi_n^{(0)}$

λ의 1승 : $H_0\psi_n^{(1)} + H'\psi_n^{(0)} = E_n^{(0)}\psi_n^{(1)} + E_n^{(1)}\psi_n^{(0)}$ ------- (1.4)

λ의 2승 : $H_0\psi_n^{(2)} + H'\psi_n^{(1)} = E_n^{(0)}\psi_n^{(2)} + E_n^{(1)}\psi_n^{(1)} + E_n^{(2)}\psi_n^{(0)}$ ------ (1.5)

$\vdots \qquad \vdots \qquad \vdots$

첫 번째 방정식은 우리가 이미 그 해를 알고 있는 건드려지기 전 해밀토니안의 슈뢰딩거 방정식이므로, λ의 1승부터 생각해보자. (1.4)식을 다시 쓰면

$$(H_0 - E_n^{(0)})\psi_n^{(1)} = (E_n^{(1)} - H')\psi_n^{(0)}, \quad \text{-------- (1.6)}$$

(1.5)식을 다시 쓰면

$$(H_0 - E_n^{(0)})\psi_n^{(2)} = (E_n^{(1)} - H')\psi_n^{(1)} + E_n^{(2)}\psi_n^{(0)} \quad \text{------- (1.7)}$$

이 된다. 우리는 이제 (1.6)식으로부터 $E_n^{(1)}$, $\psi_n^{(1)}$을 구할 수 있고, (1.7)식으로부터 $E_n^{(2)}$, $\psi_n^{(2)}$를 구할 수 있다. 이를 위하여 다시 $\psi_n^{(1)}$과 $\psi_n^{(2)}$를 건드려지기 전 고유상태들로 전개하자.

$$\psi_n^{(1)} = \sum_{m \neq n} C_{nm}^{(1)}\psi_m^{(0)},\ \psi_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} C_{nm}^{(2)}\psi_m^{(0)}, \ldots;\quad C_{nn}^{(i)} = 0,\ i = 1,2,\ldots \quad \text{----- (1.8)}$$

여기서 우리가 $\psi_n^{(i)}(i = 1,2,\ldots)$를 전개함에 있어 $C_{nn}^{(i)} = 0$으로 놓을 수 있는 이유는 전체 상태함수 $\psi_n = \psi_n^{(0)} + \lambda\psi_n^{(1)} + \lambda^2\psi_n^{(2)} + \cdots$ 에서 $\psi_n^{(i)}$ $(i > 0)$들이 $\psi_n^{(0)}$을 포함하고 있더라도($C_{nn}^{(i)} \neq 0$) 이는 다시 $\psi_n^{(0)}$을 배제한 $\psi_n^{(i)}$ ($C_{nn}^{(i)} = 0, i > 0$)들로 다음과 같이 쓸 수 있고,

$$\psi_n = (1 + \lambda C_{nn}^{(1)} + \lambda^2 C_{nn}^{(2)} + \cdots)\psi_n^{(0)} + \lambda\psi_n^{(1)} + \lambda^2\psi_n^{(2)} + \cdots$$

이는 다시 규격화를 통해 원래 쓴 표현과 동일하게 만들 수 있기 때문이다. 이는 또한 (1.6)식과 (1.7)식의 좌변에서 $\psi_n^{(1)}$과 $\psi_n^{(2)}$에 $\psi_n^{(0)}$ 항을 각각 추가하더라도 (1.2)식에 의해 방정식에 변화를 주지 않으므로 처음부터 배제하더라도 동일한 결과를 줄 것임을 보여준다.

이제 디랙의 브라-켓 기호를 써서 (1.6)식의 왼쪽에 $<\psi_k^{(0)}|$을 곱하면

$$\langle \psi_k^{(0)}|H_0|\psi_n^{(1)}\rangle - \langle \psi_k^{(0)}|E_n^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle = \langle \psi_k^{(0)}|E_n^{(1)}|\psi_n^{(0)}\rangle - \langle \psi_k^{(0)}|H'|\psi_n^{(0)}\rangle$$

가 된다. 여기서 (1.8)식을 대입하여 다시 쓰면 다음가 같이 된다.

$$\sum_{m \neq n} C_{nm}^{(1)} E_m^{(0)}\langle \psi_k^{(0)}|\psi_m^{(0)}\rangle - E_n^{(0)}\sum_{m \neq n} C_{nm}^{(1)}\langle \psi_k^{(0)}|\psi_m^{(0)}\rangle = E_n^{(1)}\langle \psi_k^{(0)}|\psi_n^{(0)}\rangle - \langle \psi_k^{(0)}|H'|\psi_n^{(0)}\rangle$$

여기서 $\langle \psi_l^{(0)}|\psi_m^{(0)}\rangle = \delta_{lm}$의 관계를 적용하면 위 식은 다음과 같이 된다.

$$\sum_{m \neq n} C_{nm}^{(1)}(E_m^{(0)} - E_n^{(0)})\delta_{km} = E_n^{(1)}\delta_{kn} - \langle \psi_k^{(0)}|H'|\psi_n^{(0)}\rangle$$

여기서 $k = n$와 $k \neq n$의 두 가지 경우로 나누어 보면 위 식은 다음과 같이 된다.

먼저 $k = n$인 경우 $m \neq n$이므로 δ_{km} 항은 0이 된다. 즉, 다음의 결과를 얻는다.

$$E_n^{(1)} = \langle \psi_n^{(0)}|H'|\psi_n^{(0)}\rangle \equiv H'_{nn}$$

다음으로 $k \neq n$인 경우, 다음의 결과를 얻는다.

$$C_{nk}^{(1)}(E_k^{(0)}-E_n^{(0)}) = -\langle\psi_k^{(0)}|H'|\psi_n^{(0)}\rangle\ ,\ \text{즉}\ C_{nk}^{(1)} = \frac{\langle\psi_k^{(0)}|H'|\psi_n^{(0)}\rangle}{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}} \equiv \frac{H'_{kn}}{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}}\ .$$

이제 λ의 이차항에 대한 결과를 얻기 위해서 (1.7)식의 왼쪽에 $<\psi_k^{(0)}|$ 를 작용하면 다음 식을 얻는다.

$$\langle\psi_k^{(0)}|H_0|\psi_n^{(2)}\rangle - \langle\psi_k^{(0)}|E_n^{(0)}|\psi_n^{(2)}\rangle = \langle\psi_k^{(0)}|E_n^{(1)}|\psi_n^{(1)}\rangle - \langle\psi_k^{(0)}|H'|\psi_n^{(1)}\rangle + \langle\psi_k^{(0)}|E_n^{(2)}|\psi_n^{(0)}\rangle$$

다시 (1.8)식을 대입하면 다음과 같이 된다.

$$\sum_{m\neq n} C_{nm}^{(2)} E_m^{(0)} \langle\psi_k^{(0)}|\psi_m^{(0)}\rangle - E_n^{(0)} \sum_{m\neq n} C_{nm}^{(2)} \langle\psi_k^{(0)}|\psi_m^{(0)}\rangle$$
$$= E_n^{(1)} \sum_{m\neq n} C_{nm}^{(1)} \langle\psi_k^{(0)}|\psi_m^{(0)}\rangle - \sum_{m\neq n} C_{nm}^{(1)} \langle\psi_k^{(0)}|H'|\psi_m^{(0)}\rangle + E_n^{(2)} \langle\psi_k^{(0)}|\psi_n^{(0)}\rangle$$

다시 $\langle\psi_l^{(0)}|\psi_m^{(0)}\rangle = \delta_{lm}$ 와 $\langle\psi_k^{(0)}|H'|\psi_m^{(0)}\rangle \equiv H'_{km}$ 을 쓰면 위 식은 다음과 같이 된다.

$$\sum_{m\neq n} C_{nm}^{(2)} E_m^{(0)} \delta_{km} - E_n^{(0)} \sum_{m\neq n} C_{nm}^{(2)} \delta_{km} = E_n^{(1)} \sum_{m\neq n} C_{nm}^{(1)} \delta_{km} - \sum_{m\neq n} C_{nm}^{(1)} H'_{km} + E_n^{(2)} \delta_{kn}$$

1차항에서의 경우와 같이 $k=n$ 과 $k\neq n$ 의 경우로 나누어 생각하자.

먼저 $k=n$ 인 경우, $\delta_{km}=0$ 이 되어 우리는 다음의 결과를 얻는다.

$$E_n^{(2)} = \sum_{m\neq n} C_{nm}^{(1)} H'_{nm} = \sum_{m\neq n} \frac{H'_{mn} H'_{nm}}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}} = \sum_{m\neq n} \frac{|H'_{mn}|^2}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}$$

위의 맨 마지막 과정에서 우리는 $H'_{nm} = \langle\psi_n^{(0)}|H'|\psi_m^{(0)}\rangle = H'^{*}_{mn}$ 의 관계를 썼다.

다음으로 $k\neq n$ 인 경우는 다음의 관계식을 얻는다.

$$(E_k^{(0)}-E_n^{(0)}) C_{nk}^{(2)} = E_n^{(1)} C_{nk}^{(1)} - \sum_{m\neq n} C_{nm}^{(1)} H'_{km}$$

이제 앞에서 얻은 $E_n^{(1)}$ 과 $C_{nm}^{(1)}$ 의 결과를 대입하면 $C_{nk}^{(2)}$ 를 얻는다.

$$C_{nk}^{(2)} = \sum_{m\neq n} \frac{H'_{mn} H'_{km}}{(E_n^{(0)}-E_k^{(0)})(E_n^{(0)}-E_m^{(0)})} - \frac{H'_{nn} H'_{kn}}{(E_n^{(0)}-E_k^{(0)})^2}$$

10.2 겹쳐진 경우 (Degenerate Case)

겹쳐진 상태들(degenerate states)의 예로서 2차원 단순 조화떨개를 생각해 보자.

$$H = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{1}{2}k(x^2+y^2) \equiv H_x + H_y$$

여기서, $H_x = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2$, $H_y = \frac{p_y^2}{2m} + \frac{1}{2}ky^2$ 로 놓으면 이들은 각각 다음 관계를 만족하는 고유상태 $|n_x>$, $|n_y>$ 를 갖는다:

$$H_x|n_x> = \hbar w(n_x+\frac{1}{2})|n_x>,\quad H_y|n_y> = \hbar w(n_y+\frac{1}{2})|n_y>\ .$$

여기서 $w=\sqrt{\dfrac{k}{m}}$ 이고, 이제 전체 해밀토니안 H 는 다음의 고유값과 고유상태를 갖는다.

$H|n_x,n_y>=\hbar w(n_x+n_y+1)|n_x,n_y>=\hbar w(n+1)|n_x,n_y>$

여기서 $n=n_x+n_y$ 이다. 이를 보면, $n=0$ 의 경우에는 $(n_x,n_y=0)$ 의 한 상태만 존재하지만, $n=1$ 의 경우에는 두 상태 $(n_x=1,n_y=0)$ 와 $(n_x=0,n_y=1)$ 가 동일한 에너지를 가져서 2겹의 겹친(2-fold degenerate) 상태를 이룬다. $n=3$ 의 경우에는 3겹의 겹친 상태를 이루게 된다. 이와 같이 겹쳐져 있는 상태들의 경우 앞에서 구한 겹치지 않은 경우의 건드림 이론을 사용할 수 없다. 그 이유는 다음과 같다. 앞에서처럼 전체 해밀토니안을 $H=H_0+\lambda H'$ 라고 하고, H_0 의 겹친 상태들이 동일한 에너지 $E_D^{(0)}$ 를 갖는다고 하자.

$$H_0|\psi_i^{(0)}>=E_D^{(0)}|\psi_i^{(0)}> \quad \text{for} \quad 1\le i\le q \qquad \text{-------} \ (2.1)$$

그리고 겹치지 않은 상태들의 경우 원래와 같이 주어진다고 하자.

$$H_0|\psi_i^{(0)}>=E_i^{(0)}|\psi_i^{(0)}>, \quad E_i\neq E_j, \quad \text{for} \quad i>q \quad \text{-------} \ (2.2)$$

그런데 앞의 건드림 공식의 $\psi_n^{(1)}=\sum_{m\neq n}C_{nm}^{(1)}\psi_m^{(0)}$ 에서 계수 $C_{nm}^{(1)}$ 가 다음과 같이 주어졌다.

$$C_{nm}^{(1)}=\langle\psi_m^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle=\frac{H'_{mn}}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}=\frac{\langle\psi_m^{(0)}|H'|\psi_n^{(0)}\rangle}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}.$$

여기서 $m\neq n$ 이고 $m,n\le q$ 인 경우, $E_n^{(0)}=E_m^{(0)}$ 이 되므로 분모가 0 이 되어 위 공식은 발산하게 되어 사용할 수 없다. 이제 이러한 문제점이 생기지 않도록 우리는 다음과 같은 방식으로 겹친 상태들의 건드림 효과를 계산한다.

이를 위해서 우리는 다음과 같이 건드림 해밀토니안 H'의 고유상태가 되는

$$H'|\overline{\psi_i}^{(0)}>=E_i'|\overline{\psi_i}^{(0)}> \quad (i=1,\cdots,q), \quad \text{------} \ (2.3)$$

새로운 기저상태들 $\overline{\psi_i}^{(0)}$ 을 기존의 겹친 상태들의 선형 결합으로 다음과 같이 정의한다.

$$\overline{\psi_i}^{(0)}=\sum_{j=1}^{q}a_{ij}|\psi_j^{(0)}> \qquad \text{-------} \ (2.4)$$

여기서 기억할 점은 새로운 기저상태들 역시 H_0 에 대해서 원래의 겹친 상태들과 동일한 고유값 $E_D^{(0)}$ 을 갖는다는 것이다:

$$H_0|\overline{\psi_i}^{(0)}>=\sum_{j=1}^{q}a_{ij}H_0|\psi_j^{(0)}>=E_D^{(0)}\sum_{j=1}^{q}a_{ij}|\psi_j^{(0)}>=E_D^{(0)}|\overline{\psi_i}^{(0)}>. \ \text{----} \ (2.5)$$

위에서 우리는 $i\le q$ 인 모든 원래 상태들 $\psi_i^{(0)}$ 가 $E_D^{(0)}$ 의 동일한 고유값을 갖는다는 (2.1)식을 이용하였다. 이제 새로운 기저상태들 $\overline{\psi_i}^{(0)}$ 가 (2.3)식에서 서로 다른 고유값들 E_i' 를 갖는다면, 이 새로운 상태들은 전체 해밀토니안에 대해서도 서로 다른 고유값을 갖는 겹치지 않은 고유상태들이 된다.

$$H|\overline{\psi_i}^{(0)}>=(H_0+\lambda H')|\overline{\psi_i}^{(0)}>=(E_D^{(0)}+\lambda E_i')|\overline{\psi_i}^{(0)}> \quad \text{for} \quad i=1,\cdots,q$$

즉, 새로운 상태 $\overline{\psi_i}^{(0)}$는 전체 해밀토니안에 대해서 고유값 $E_i = E_D^{(0)} + \lambda E_i{}'$를 갖는다. 또 새 기저상태들은 $i, j < q$, $i \neq j$ 인 경우 $\langle \overline{\psi_i}^{(0)} | H' | \overline{\psi_j}^{(0)} \rangle = E_j{}' \langle \overline{\psi_i}^{(0)} | \overline{\psi_j}^{(0)} \rangle = 0$ 이 된다. 이제 새 기저상태들과 해당 고유값들을 실제 구하는 방법에 대해 생각해보자. 먼저 (2.3)식의 양변에 항등연산자(identity operator) $\sum_j \left| \psi_j{}^{(0)} >< \psi_j{}^{(0)} \right|$ 를 (여기서 j는 모든 고유상태들을 포함한다) 작용시켜보자.

$$\sum_j | \psi_j{}^{(0)} >< \psi_j{}^{(0)} | H' | \overline{\psi_i}^{(0)} > = E_i' \sum_j | \psi_j{}^{(0)} >< \psi_j{}^{(0)} | \overline{\psi_i}^{(0)} >$$

위식에 (2.4)식의 전개공식을 대입하면 다음과 같이 된다.

$$\sum_j | \psi_j{}^{(0)} >< \psi_j{}^{(0)} | H' \sum_{k=1}^{q} a_{ik} | \psi_k^{(0)} > = E_i' \sum_j | \psi_j{}^{(0)} >< \psi_j{}^{(0)} | \sum_{k=1}^{q} a_{ik} \psi_k^{(0)} >$$

일단 위식의 우변은 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\sum_j | \psi_j{}^{(0)} > E_i' \sum_{k=1}^{q} a_{ik} \delta_{jk} = \sum_{j=1}^{q} | \psi_j{}^{(0)} > E_i' \, a_{ij}$$

여기서 우리가 주목할 점은 맨 마지막 단계에서 j에 대한 합이 모든 상태들에 대한 합으로부터 1에서 q번째 상태까지의 합으로 제한되게 되었다는 것이다. 다음으로 좌변을 다음과 같이 다시 쓰고

$$\sum_j | \psi_j{}^{(0)} > \sum_{k=1}^{q} a_{ik} < \psi_j{}^{(0)} | H' | \psi_k^{(0)} > = \sum_j | \psi_j{}^{(0)} > \sum_{k=1}^{q} a_{ik} H'{}_{jk} \, ,$$

위에서 얻은 우변의 결과와 비교하면, 기저상태 $| \psi_j{}^{(0)} >$ 들이 서로 독립이라는 점으로부터 좌변의 j에 대한 합 역시 1에서 q번째 상태까지의 합만이 살아남게 됨을 알 수 있다. 그러므로 우리는 다시 기저상태 $| \psi_j{}^{(0)} >$ 들이 서로 독립이라는 점으로부터 다음의 관계식을 얻는다.

$$\sum_{k=1}^{q} H'{}_{jk} \; a_{ik} = E_i' \, a_{ij} \quad (j = 1, \cdots, q) \qquad \text{-------------- (2.6)}$$

여기서 첨자 i는 고정된 값이지만, 그 범위는 역시 위의 j와 마찬가지로 1에서 q까지 이다. 이제 i번째 열벡터를 다음과 같이 정의하면,

$$\overrightarrow{a_i} = \begin{pmatrix} a_{i1} \\ \vdots \\ a_{ij} \\ \vdots \\ a_{iq} \end{pmatrix}$$

(2.6)식은 다음과 같은 행렬방정식으로 쓸 수 있다.

$$\begin{pmatrix} H'_{11} \ H'_{12} \cdots\cdots H'_{1q} \\ \vdots \\ H'_{j1} \quad \cdots\cdots\cdots \\ \vdots \\ H'_{q1} \quad \cdots\cdots\cdots \quad H'_{qq} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{i1} \\ \vdots \\ a_{ik} \\ \vdots \\ a_{iq} \end{pmatrix} = E'_i \begin{pmatrix} a_{i1} \\ \vdots \\ a_{ij} \\ \vdots \\ a_{iq} \end{pmatrix} \qquad \text{-----------} \quad (2.7)$$

이 식이 유효하려면 $\det\left(H' - E'_i 1\right) = 0$ 의 조건이 만족되어야 하는데, 우리는 이 조건식을 영년(또는 고유)방정식(secular equation)이라고 부른다.

이제 위의 방식을 적용하여 겹져진 경우의 건드림으로 이 절의 시작 부분에서 언급한 2차원 단순 조화떨개에서 건드림 항이 추가된 경우를 생각해 보자. 우선 해를 알고 있는 원래의 해밀토니안과 고유상태를 각각 다음과 같이 H_0 와 $\psi_n^{(0)}$ 로 쓰자.

$$H_0 = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2) + \frac{1}{2}k(x^2 + y^2),$$

$$\left|\psi_n^{(0)}\right> = |n_x, n_y> \ \equiv |n_x> \otimes |n_y> .$$

여기서

$$a \equiv \frac{1}{\sqrt{2}\,\beta}(x + \frac{i}{mw}\,p_x), \quad a^\dagger \equiv \frac{1}{\sqrt{2}\,\beta}(x - \frac{i}{mw}\,p_x), \quad w \equiv \sqrt{\frac{k}{m}}\ ,$$

$$b \equiv \frac{1}{\sqrt{2}\,\beta}(y + \frac{i}{mw}\,p_y), \quad b^\dagger \equiv \frac{1}{\sqrt{2}\,\beta}(y - \frac{i}{mw}\,p_y)\ , \quad \beta \equiv \sqrt{\frac{\hbar}{mw}}$$

로 정의하면, a, b 와 $a^\dagger, b^\dagger$ 는 각각 x, y 방향의 내림과 올림 연산자들이 되고,

$$H_0 = \hbar w(a^\dagger a + b^\dagger b + 1)$$

이 되어, $H_0\left|\psi_n^{(0)}\right> = E_n^{(0)}\left|\psi_n^{(0)}\right>$ 은 $H_0|n_x, n_y> = (n_x + n_y + 1)|n_x, n_y>$에 해당하므로, $E_n^{(0)}$ 에서의 n 은 $n = n_x + n_y$ 가 된다. 이는 바닥상태$(n=0)$의 경우는 하나의 상태만 존재하지만, 첫 번째 들뜬상태$(n=1)$의 경우는 두 개의 상태, $(n_x = 1, n_y = 0)$와 $(n_x = 0, n_y = 1)$가 존재함을 보여준다. 겹쳐진 정도는 n 에 비례해서 늘어나는데, 그 수는 $n+1$ 임을 알 수 있다. 이제 가장 간단한 첫 번째 들뜬 상태들의 경우에 대해 겹쳐진 경우의 건드림 효과를 계산해 보자.

먼저 전체 해밀토니안 $H = H_0 + \lambda H'$ 에서 건드림 해밀토니안이 $H' = \epsilon x$ 인 경우를 생각하자. 첫 번째 들뜬 상태들의 경우 (2.7)식에서 $q = 2$ 가 되며 H' 은 다음과 같이 2×2 행렬로 쓸 수 있다.

$$H' = \begin{pmatrix} \langle 1,0|H'|1,0\rangle & \langle 1,0|H'|0,1\rangle \\ \langle 0,1|H'|1,0\rangle & \langle 0,1|H'|0,1\rangle \end{pmatrix}$$

여기서 $x = \frac{\beta}{\sqrt{2}}(a + a^\dagger)$ 이므로 이 행렬요소는 모두 0 이 되어 건드림 효과는 없다:

$$H' = \frac{\epsilon\beta}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} \langle 1,0|a+a^{\dagger}|1,0\rangle & \langle 1,0|a+a^{\dagger}|0,1\rangle \\ \langle 0,1|a+a^{\dagger}|1,0\rangle & \langle 0,1|a+a^{\dagger}|0,1\rangle \end{pmatrix} = 0.$$

위 계산에서 $a, a^{\dagger}$는 $|n_x, n_y>$ 의 첫 번째 요소인 n_x 에만 작용했음을 주의하자.

다음으로 건드림 해밀토니안이 $H' = \epsilon xy$ 로 주어진 경우에 대해서 생각해 보자. 여기서 $xy = \frac{\beta^2}{2}(a+a^{\dagger})(b+b^{\dagger})$ 로 주어지므로, 건드림 행렬요소는 다음과 같이 된다.

$$H' = \frac{\epsilon\beta^2}{2}\begin{pmatrix} \langle 1,0|(a+a^{\dagger})(b+b^{\dagger})|1,0\rangle & \langle 1,0|(a+a^{\dagger})(b+b^{\dagger})|0,1\rangle \\ \langle 0,1|(a+a^{\dagger})(b+b^{\dagger})|1,0\rangle & \langle 0,1|(a+a^{\dagger})(b+b^{\dagger})|0,1\rangle \end{pmatrix}$$

이제 행렬요소들 중 $\langle 1,0|a^{\dagger}b|0,1\rangle = \langle 1,0|1,0\rangle$ 과 $\langle 0,1|ab^{\dagger}|1,0\rangle = \langle 0,1|0,1\rangle$ 의 두 항만이 살아남아 다음의 결과를 얻는다.

$$H' = \begin{pmatrix} 0 & \frac{\epsilon\beta^2}{2} \\ \frac{\epsilon\beta^2}{2} & 0 \end{pmatrix}$$

이제 (2.7)식의 해를 주는 영년방정식은 다음과 같이 주어진다.

$$\det(H' - E'1) = \det\begin{pmatrix} -E' & \frac{\epsilon\beta^2}{2} \\ \frac{\epsilon\beta^2}{2} & -E' \end{pmatrix} = 0$$

이로부터 우리는 건드림 해밀토니안의 고유값으로

$$E' = \pm\frac{\epsilon\beta^2}{2}$$

를 얻는다. 이를 만족하는 고유상태들은 아래와 같이 각 고유값을 (2.7)식에 대입하여 얻을 수 있다. 먼저 $E_1' = +\frac{\epsilon\beta^2}{2}$ 인 경우, $\frac{\epsilon\beta^2}{2} \equiv \Xi$ 로 놓으면 (2.7)식은 다음과 같이 된다.

$$\begin{pmatrix} 0 & \Xi \\ \Xi & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_{11} \\ a_{12} \end{pmatrix} = \Xi\begin{pmatrix} a_{11} \\ a_{12} \end{pmatrix}$$

이는 $a_{11} = a_{12}$ 임을 보여주므로 고유상태를 나타내는 열벡터 $\overrightarrow{a_1}$은 $\overrightarrow{a_1} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ 이 된다.

즉, 첫 번째 들뜬 상태의 새로운 고유상태는 $\overline{\psi_1}^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1,0> + |0,1>)$ 이 된다.

마찬가지로 $E_2' = -\frac{\epsilon\beta^2}{2}$ 인 경우, (2.7)식은 다음과 같이 된다.

$$\begin{pmatrix} 0 & \Xi \\ \Xi & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_{21} \\ a_{22} \end{pmatrix} = -\Xi\begin{pmatrix} a_{21} \\ a_{22} \end{pmatrix}$$

이는 $a_{21} = -a_{22}$ 임을 보여주므로 고유상태를 나타내는 열벡터 $\overrightarrow{a_2}$는 $\overrightarrow{a_2} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$ 이

된다. 즉, 첫 번째 들뜬 상태의 새로운 고유상태는 $\overline{\psi_2}^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\,|1,0> - |0,1>\,)$ 이 된다. 그러므로 이 경우 첫 번째 들뜬 상태의 전체 해밀토니안에 대한 관계는 다음과 같다.

$$H\overline{\psi_1}^{(0)} = E_1\overline{\psi_1}^{(0)}, \quad E_1 = E_1^{(0)} + \lambda\frac{\epsilon\beta^2}{2}, \quad \overline{\psi_1}^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\,|1,0> + |0,1>\,),$$

$$H\overline{\psi_2}^{(0)} = E_2\overline{\psi_2}^{(0)}, \quad E_2 = E_1^{(0)} - \lambda\frac{\epsilon\beta^2}{2}, \quad \overline{\psi_2}^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\,|1,0> - |0,1>\,).$$

즉, 첫 번째 들뜬 상태$(n=1)$의 에너지 준위는 다음과 같이 분리된다($\lambda > 0$ 일 경우).

$$n=1 \longrightarrow \begin{cases} 2\hbar w + \frac{\lambda\epsilon\beta^2}{2} \\ 2\hbar w - \frac{\lambda\epsilon\beta^2}{2} \end{cases}$$

그러나 바닥상태$(n=0)$의 경우는 처음부터 겹친 상태가 아니었으므로 변하지 않는다.

$$n=0 \longrightarrow E_0 = \hbar w$$

▶ 겹친 상태가 존재할 때 겹치지 않은 상태들에 대한 건드림의 적용 ◀

이제까지 우리는 겹쳐진 상태들의 경우에 건드림의 효과를 계산하였다. 그런데 겹치지 않은 상태들은 이 경우에 건드림의 효과가 어떻게 달라질까? 이에 대해 알아보기 위하여 먼저 원래의 겹친 상태들이 앞에서처럼 건드림에 의하여 모두 분리되었다고 가정하자. 이제 0-차 기저상태들을 앞에서 구한 건드림 해밀토니안의 새로운 고유상태들 $\overline{\psi_i}^{(0)}\,(i \le q)$과 원래 해밀토니안의 겹치지 않은 상태들 $\psi_i^{(0)}\,(i > q)$로 다음과 같이 새로이 정의하자.

$$\begin{cases} \widetilde{\psi_i}^{(0)} = \overline{\psi_i}^{(0)}, & (i \le q) \\ \widetilde{\psi_i}^{(0)} = \psi_i^{(0)}, & (i > q) \end{cases}$$

여기서 $\overline{\psi_i}^{(0)}\,(i \le q)$와 $\psi_i^{(0)}\,(i > q)$는 각각 전체 및 원래 해밀토니안의 고유상태들이다.

$$H\,|\,\overline{\psi_i}^{(0)} > = (H_0 + \lambda H')\,|\,\overline{\psi_i}^{(0)} > = (E_D^{(0)} + \lambda E_i{}')\,|\,\overline{\psi_i}^{(0)} > \quad (i \le q),$$

$$H_0|\psi_i^{(0)} > = E_i^{(0)}|\psi_i^{(0)} > \quad (i > q).$$

그리고 모든 상태들은 겹치지 않았음$(E_i \ne E_j \;\text{ for }\; i \ne j)$을 기억하자. 우리가 먼저 주목할 점은 $1,\ldots,q$의 새로운 기저상태들 $\overline{\psi_i}^{(0)}$은 이제 건드림을 포함한 전체 해밀토니안의 정확한 해라는 것이다. 따라서 우리는 이제 건드림 효과를 겹치지 않은 상태들의 경우에만 구하면 된다. 즉 우리는 다음 슈뢰딩거 방정식의 해를 구하고자 하는 것이다.

$$H\psi_j = E_j\,\psi_j\,, \quad H = H_0 + \lambda H', \quad \psi_j = \psi_j^{(0)} + \lambda\psi_j^{(1)} + \lambda^2\psi_j^{(2)} + \cdots \quad , \quad j > q$$

이제 앞에서와 마찬가지로 상태함수와 에너지를 λ의 차수로 전개하여

$$\psi_j^{(i)} = \sum_{k\neq j} C_{jk}^{(i)} \widetilde{\psi_k}^{(0)} = \sum_{k=1}^{q} C_{jk}^{(i)} \overline{\psi_k}^{(0)} + \sum_{\substack{k \not\in D \\ k\neq j}} C_{jk}^{(i)} \psi_k^{(0)}, \quad i \geq 1\,,$$

$$E_j = E_j^{(0)} + \lambda E_j^{(1)} + \lambda^2 E_j^{(2)} + \cdots \ , \quad j > q\ ,$$

위의 슈뢰딩거 방정식에 대입하면 다음의 관계식들을 얻는다.

λ의 0승 계수: $H_0 \psi_j^{(0)} = E_j^{(0)} \psi_j^{(0)}$

λ의 1승 계수: $H' \psi_j^{(0)} + H_0 \psi_j^{(1)} = E_j^{(0)} \psi_j^{(1)} + E_j^{(1)} \psi_j^{(0)}$

λ의 2승 계수: $H' \psi_j^{(1)} + H_0 \psi_j^{(2)} = E_j^{(0)} \psi_j^{(2)} + E_j^{(1)} \psi_j^{(1)} + E_j^{(2)} \psi_j^{(0)}$

$$\vdots$$

이제 λ의 1승 계수의 방정식에 $< \widetilde{\psi_k}^{(0)}|$ 를 작용시켜보자.

$$\langle \widetilde{\psi_k}^{(0)} | H' | \psi_j^{(0)} \rangle + \langle \widetilde{\psi_k}^{(0)} | H_0 | \psi_j^{(1)} \rangle = \langle \widetilde{\psi_k}^{(0)} | E_j^{(0)} | \psi_j^{(1)} \rangle + \langle \widetilde{\psi_k}^{(0)} | E_j^{(1)} | \psi_j^{(0)} \rangle \quad \text{---} \ (2.8)$$

먼저 $k \leq q$ 인 경우를 살펴보면 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$E_k' \langle \overline{\psi_k}^{(0)} | \psi_j^{(0)} \rangle + E_D^{(0)} \langle \overline{\psi_k}^{(0)} | \psi_j^{(1)} \rangle = E_j^{(0)} \langle \overline{\psi_k}^{(0)} | \psi_j^{(1)} \rangle + E_j^{(1)} \langle \overline{\psi_k}^{(0)} | \psi_j^{(0)} \rangle$$

여기서 우리는 $H' | \overline{\psi_k}^{(0)} > \; = E_k' | \overline{\psi_k}^{(0)} >$, $H_0 | \overline{\psi_k}^{(0)} > \; = E_D^{(0)} | \overline{\psi_k}^{(0)} > \ (k \leq q)$ 의 관계를 사용하였다. 한편, 위에서 $j > q$ 이므로 $\langle \overline{\psi_k}^{(0)} | \psi_j^{(0)} \rangle = 0$ 이 된다. 그러므로 위식은 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$(E_D^{(0)} - E_j^{(0)}) \langle \overline{\psi_k}^{(0)} | \psi_j^{(1)} \rangle = 0$$

그런데 $E_D^{(0)} \neq E_j^{(0)}$ $(\text{for } j > q)$ 이므로 우리는 다음의 결과를 얻는다.

$$\langle \overline{\psi_k}^{(0)} | \psi_j^{(1)} \rangle = C_{jk}^{(1)} = 0 \quad (j > q,\ k \leq q)$$

다음으로 $k > q$ 인 경우 (2.8)식은 다음과 같이 된다.

$$\langle \psi_k^{(0)} | H' | \psi_j^{(0)} \rangle + \langle \psi_k^{(0)} | H_0 | \psi_j^{(1)} \rangle = E_j^{(0)} \langle \psi_k^{(0)} | \psi_j^{(1)} \rangle + E_j^{(1)} \langle \psi_k^{(0)} | \psi_j^{(0)} \rangle$$

이는 다시 $k = j$ 인 경우와 $k \neq j$ 인 경우의 두 가지로 나누어 생각할 수 있다.

첫 번째, $k = j$ 인 경우 위식은 다음과 같이 된다.

$$H_{jj}' + E_j^{(0)} \langle \psi_j^{(0)} | \psi_j^{(1)} \rangle = E_j^{(0)} \langle \psi_j^{(0)} | \psi_j^{(1)} \rangle + E_j^{(1)}$$

그런데 $\langle \psi_j^{(0)} | \psi_j^{(1)} \rangle = C_{jj}^{(1)} = 0$ 으로 처음부터 놓았으므로, 다음의 결과를 얻는다.

$$E_j^{(1)} = H_{jj}' = \langle \psi_j^{(0)} | H' | \psi_j^{(0)} \rangle$$

두 번째, $j \neq k$ 인 경우 다음의 관계식을 얻는다.

$$H_{kj}' + E_k^{(0)} \langle \psi_k^{(0)} | \psi_j^{(1)} \rangle = E_j^{(0)} \langle \psi_k^{(0)} | \psi_j^{(1)} \rangle$$

위식에서 우리는 겹치지 않은 상태들의 건드림 경우와 동일한 다음 관계식을 얻는다.

$$\langle \psi_k^{(0)} | \psi_j^{(1)} \rangle = C_{jk}^{(1)} = \frac{H_{kj}'}{E_j^{(0)} - E_k^{(0)}}\,, \quad (j, k > q,\ \ j \neq k).$$

이를 써서 최종적으로 $\psi_j^{(1)} = \sum_{\substack{k \notin D \\ (k \neq j)}} C_{jk}^{(1)} \psi_k^{(0)} \ (j > q,\ D \equiv 1,2,...,q)$ 으로 표현할 수 있다.

이제 λ의 2승 계수의 방정식에 $< \widetilde{\psi_k}^{(0)}|$ 를 작용시켜보자.

$$\langle \widetilde{\psi_k}^{(0)} | H_0 | \psi_j^{(2)} \rangle + \langle \widetilde{\psi_k}^{(0)} | H' | \psi_j^{(1)} \rangle = E_j^{(0)} \langle \widetilde{\psi_k}^{(0)} | \psi_j^{(2)} \rangle + E_j^{(1)} \langle \widetilde{\psi_k}^{(0)} | \psi_j^{(1)} \rangle + E_j^{(2)} \langle \widetilde{\psi_k}^{(0)} | \psi_j^{(0)} \rangle$$

이를 앞에서와 마찬가지로 $k \le q$ 인 경우와 $k > q$인 경우로 나누어 생각해 보겠다.

먼저 $k \le q$ 인 경우를 살펴보면 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\langle \overline{\psi_k}^{(0)} | H_0 | \psi_j^{(2)} \rangle + \langle \overline{\psi_k}^{(0)} | H' | \psi_j^{(1)} \rangle = E_j^{(0)} \langle \overline{\psi_k}^{(0)} | \psi_j^{(2)} \rangle + E_j^{(1)} \langle \overline{\psi_k}^{(0)} | \psi_j^{(1)} \rangle + E_j^{(2)} \langle \overline{\psi_k}^{(0)} | \psi_j^{(0)} \rangle$$

-------- (2.9)

다시 $H' | \overline{\psi_k}^{(0)} > = E_k' | \overline{\psi_k}^{(0)} >$, $H_0 | \overline{\psi_k}^{(0)} > = E_D^{(0)} | \overline{\psi_k}^{(0)} > \ (k \le q)$ 의 관계와 $j > q$ 이므로 $\langle \overline{\psi_k}^{(0)} | \psi_j^{(0)} \rangle = 0$ 이 됨을 사용하면 위식은 다음과 같이 된다.

$$E_D^{(0)} \langle \overline{\psi_k}^{(0)} | \psi_j^{(2)} \rangle + E_k' \langle \overline{\psi_k}^{(0)} | \psi_j^{(1)} \rangle = E_j^{(0)} \langle \overline{\psi_k}^{(0)} | \psi_j^{(2)} \rangle + E_j^{(1)} \langle \overline{\psi_k}^{(0)} | \psi_j^{(1)} \rangle$$

다시 앞에서 얻은 $\langle \overline{\psi_k}^{(0)} | \psi_j^{(1)} \rangle = C_{jk}^{(1)} = 0 \ (j > q,\ k \le q)$ 의 결과를 적용하면, 이는 다음과 같이 쓰여진다.

$$(E_D^{(0)} - E_j^{(0)}) \langle \overline{\psi_k}^{(0)} | \psi_j^{(2)} \rangle = 0$$

앞에서와 마찬가지로 $E_D^{(0)} \neq E_j^{(0)}$ (for $j > q$) 이므로 다시 우리는 다음 결과를 얻는다.

$$\langle \overline{\psi_k}^{(0)} | \psi_j^{(2)} \rangle = C_{jk}^{(2)} = 0 \ (j > q,\ k \le q)$$

다음으로 $k > q$ 인 경우 (2.9)식은 다음과 같이 된다.

$$\langle \psi_k^{(0)} | H_0 | \psi_j^{(2)} \rangle + \langle \psi_k^{(0)} | H' | \psi_j^{(1)} \rangle = E_j^{(0)} \langle \psi_k^{(0)} | \psi_j^{(2)} \rangle + E_j^{(1)} \langle \psi_k^{(0)} | \psi_j^{(1)} \rangle + E_j^{(2)} \langle \psi_k^{(0)} | \psi_j^{(0)} \rangle$$

다시 앞에서처럼 $k = j$ 인 경우와 $k \neq j$ 인 경우의 두 가지로 나누어 생각하자.

첫 번째, $k = j$인 경우 위식은 다음과 같이 된다.

$$E_j^{(0)} \langle \psi_j^{(0)} | \psi_j^{(2)} \rangle + \sum_{\substack{l \notin D \\ (l \neq j)}} C_{jl}^{(1)} \langle \psi_j^{(0)} | H' | \psi_l^{(0)} \rangle = E_j^{(0)} \langle \psi_j^{(0)} | \psi_j^{(2)} \rangle + E_j^{(1)} \langle \psi_j^{(0)} | \psi_j^{(1)} \rangle + E_j^{(2)}$$

여기서 $\langle \psi_j^{(0)} | \psi_j^{(1)} \rangle = \langle \psi_j^{(0)} | \psi_j^{(2)} \rangle = 0$ 이므로 위식은 다음의 결과를 준다.

$$E_j^{(2)} = \sum_{\substack{l \notin D \\ (l \neq j)}} C_{jl}^{(1)} \langle \psi_j^{(0)} | H' | \psi_l^{(0)} \rangle = \sum_{\substack{l \notin D \\ (l \neq j)}} \frac{H_{lj}' H_{jl}'}{E_j^{(0)} - E_l^{(0)}} = \sum_{\substack{l \notin D \\ (l \neq j)}} \frac{|H_{lj}'|^2}{E_j^{(0)} - E_l^{(0)}}$$

두 번째, $j \neq k$ 인 경우 다음의 관계식을 얻는다.

$$E_k^{(0)} \langle \psi_k^{(0)} | \psi_j^{(2)} \rangle + \sum_{\substack{l \notin D \\ (l \neq j)}} C_{jl}^{(1)} \langle \psi_k^{(0)} | H' | \psi_l^{(0)} \rangle = E_j^{(0)} \langle \psi_k^{(0)} | \psi_j^{(2)} \rangle + E_j^{(1)} \langle \psi_k^{(0)} | \psi_j^{(1)} \rangle$$

여기서 $\langle \psi_k^{(0)} | \psi_j^{(2)} \rangle = C_{jk}^{(2)}$, $\langle \psi_k^{(0)} | \psi_j^{(1)} \rangle = C_{jk}^{(1)}$ 이므로 위식은 다음과 같이 된다.

$$E_k^{(0)} C_{jk}^{(2)} + \sum_{\substack{l \notin D \\ (l \neq j)}} C_{jl}^{(1)} H_{kl}' = E_j^{(0)} C_{jk}^{(2)} + E_j^{(1)} C_{jk}^{(1)}$$

이를 정리하면 우리는 겹치지 않은 상태들의 건드림 경우에서와 동일한 다음 관계식을 얻는

다.

$$C_{jk}^{(2)} = \sum_{\substack{l \not\in D \\ j \neq l}} \frac{H_{lj}^{'} H_{kl}^{'}}{(E_j^{(0)} - E_k^{(0)})(E_j^{(0)} - E_l^{(0)})} - \frac{H_{kj}^{'} H_{jj}^{'}}{(E_j^{(0)} - E_k^{(0)})^2} \quad (\text{for } j,k > q\,,\ j \neq k)$$

이를 써서 최종적으로 $\psi_j^{(2)} = \sum_{\substack{k \not\in D \\ (k \neq j)}} C_{jk}^{(2)} \psi_k^{(0)}$ $(j > q,\ D \equiv 1,2,\ldots,q)$ 으로 표현할 수 있다.

이는 겹친 상태들이 있는 경우에도, 겹친 상태들의 건드림을 계산한 후에는 겹친 상태들을 제외하고, 겹치지 않은 상태들에 대해서만 겹치지 않은 건드림 이론을 동일하게 적용하면 됨을 보여준다.
